

Un esquema adaptativo semilagrangiano con elementos finitos anisótropos para la resolución de problemas de combustión

JAIME CARPIO HUERTAS¹, JUAN LUIS PRIETO ORTIZ¹,
RODOLFO BERMEJO BERMEJO²

¹ Dpto. Ingeniería Energética y Fluidomecánica, ETSI Industriales
Universidad Politécnica de Madrid. E-mail: jaime.carpio@upm.es, juanluis.prieto@upm.es.

² Dpto de Matemática Aplicada, ETSI Industriales
Universidad Politécnica de Madrid. E-mail: rbermejo@etsii.upm.es.

Resumen

En este trabajo se presenta un método numérico adaptativo para la resolución de problemas temporales de Combustión en la Mecánica de Fluidos. La discretización espacial de las ecuaciones está basada en el método de los elementos finitos y la discretización temporal se realiza con un esquema semilagrangiano para tratar de forma eficiente los términos convectivos. La característica principal de la adaptación local, es que el mallado que se construye es anisótropo, lo que le capacita para adaptarse mejor a capas límite con un reducido coste computacional. Para ello, se define un tensor métrico a cada paso de tiempo, basado en indicadores de error contruidos a priori y a posteriori. Ilustraremos el buen comportamiento del código numérico con la modelización de un problema de combustión en 2D y 3D, donde se analizará la interacción de llamas de difusión de Hidrógeno y vórtices que pueden ser generados en un flujo turbulento.

1. Introducción

La simulación numérica es una herramienta muy utilizada hoy en día para estudiar y caracterizar numerosos fenómenos físicos. Pero para obtener unos resultados numéricos que puedan ser cuantitativamente comparables con datos experimentales, se requieren dos ingredientes fundamentales: primero, un modelo matemático realista que describa

correctamente la física del problema que se pretende estudiar; segundo, un esquema numérico eficiente y preciso para resolver las ecuaciones planteadas.

Suele suceder que según el modelo matemático se ajusta más a la realidad, su resolución matemática se hace más compleja, por lo que cada vez han de emplearse técnicas numéricas mejores y más eficientes. En este artículo se pretende ilustrar la importancia de las técnicas de adaptación local para resolver de forma eficiente (sin malgastar/desaprovechar recursos computacionales) y precisa problemas donde aparecen fenómenos con escalas muy dispares, y en los que la solución presenta poca regularidad en zonas concentradas del dominio.

Desde que apareciera el primer trabajo de Babuska y Rheinbolt en 1978 [3], los algoritmos adaptativos se han empezado a utilizar cada vez con más intensidad en todos los campos de la ingeniería. En primer lugar, se empezaron a utilizar mallados refinados de forma isotrópica (ver [1]), donde se buscaba que los elementos fueran lo más equiláteros posible. Sin embargo, en gran cantidad de aplicaciones aparecen en la solución direcciones ‘preferidas’ y direccionalidades tales como capas límite, singularidades, fracturas, ondas de choque, chorros, vórtices. En todos estos casos, los refinamientos isotrópicos pierden eficiencia y están siendo sustituidos poco a poco por la adaptación anisótropa, que se adapta mejor a las necesidades del problema. Sin embargo, para crear un mallado con elementos anisótropos, no solamente el tamaño de los elementos debe ser definido, sino tan bien su forma y orientación. Éstos parámetros son necesarios para definir en cada punto del dominio un tensor métrico que es el argumento de entrada para la mayoría de generadores de mallados anisótropos. En este trabajo se utilizarán dos generadores de libre distribución que permiten trabajar tanto con problemas en 2D [9], como con problemas 3D [8].

Un campo de la ingeniería donde los elementos anisótropos proporcionan muy buenos resultados es el de la fluidodinámica (ver [7] acerca del uso de adaptación anisótropa en aplicaciones CFD). En este artículo ilustraremos el comportamiento del código numérico con un problema extraído de la dinámica de fluidos reactivos. Consideraremos la interacción de una llama de difusión con un vórtice, que puede provenir de un flujo turbulento, y que trata de atravesarla. Un esquema de este fenómeno puede verse en la Figura 1.

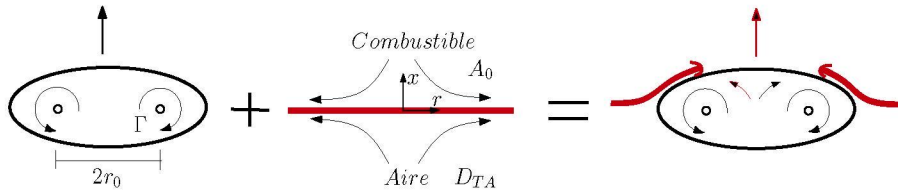


Figura 1: Esquema de la interacción de un vórtice anular de radio r_0 y circulación Γ , con una llama de difusión sometida a una velocidad de deformación constante A_0 . El campo fluido resultante podría provocar la extinción local de la llama

La configuración que pretendemos estudiar aquí es interesante ya que en la mayoría de las aplicaciones industriales las escalas características asociadas a los procesos de combustión son más pequeñas que las más pequeñas escalas de la turbulencia. Por lo tanto, la combustión ocurre en forma de llamas laminares incrustadas en delgadas capas de mezcla que son localmente distorsionadas y tensionadas por vórtices de diferente tamaño [12]. Así, el par llama de difusión/vórtice constituye un sistema bien definido, de complejidad intermedia entre las llamas laminares y las llamas turbulentas, y de gran utilidad para

profundizar e investigar en los fundamentos de los procesos de combustión que relacionan los procesos fluidodinámicos con la cinética química. Para conocer más detalles acerca de esta configuración, recomendamos al lector la lectura de Renard et al. [17] y sus referencias. Como puede intuirse del esquema de la figura, debido al carácter transitorio del problema y a la esbeltez de la llama, la mejor forma de abordar el problema numéricamente será haciendo uso de mallados anisótropos que se vayan ajustando localmente a la solución en cada paso de tiempo. Más aún, este problema se vuelve más complejo cuanto más realistas sean los mecanismos de transporte de calor, transporte de masa y la cinética química empleadas en el modelo. En este artículo consideraremos dos modelos físicos diferentes:

1. Modelo I: Los primeros modelos que surgieron pretendían estudiar los aspectos más básicos de la interacción. Para ello, el modelo matemático fue simplificado en exceso. La cinética química fue considerada como infinitamente rápida. La densidad y los coeficientes de transporte fueron considerados constantes, a fin de desacoplar el problema fluidodinámico del problema termoquímico. Todas estas simplificaciones llevan a problemas lineales, nada rígidos. Este modelo nos será útil a la hora de evaluar la convergencia y eficiencia del algoritmo numérico adaptativo.
2. Modelo II: Para atender los aspectos más cuantitativos es imprescindible tener en cuenta modelos más detallados de transporte de especies químicas y calor, junto con mecanismos de cinética química realista. En este modelo la densidad es variable, pudiéndose reproducir efectos de desplazamiento y expansión térmica en la llama. Sin embargo, estos modelos son altamente no lineales y conducen a sistemas de ecuaciones en derivadas parciales acoplados y con gran rigidez, lo que dificulta su integración numérica. Por todo esto, un algoritmo numérico con adaptación de malla local se hace imprescindible. Este modelo permitirá hacer comparaciones cuantitativas entre las simulaciones numéricas y resultados experimentales existentes con mezclas de hidrogeno/aire.

El esquema del artículo será el siguiente: en la sección 2 presentaremos las ecuaciones generales de combustión, junto con las condiciones iniciales y de contorno del problema interacción llama de difusión/vórtice. En la sección 3 se presentará el método numérico empleado para su resolución: el esquema semilagrangiano para la discretización de la ecuaciones, el cálculo del indicador del error y la definición del tensor métrico óptimo para crear la nueva triangulación espacial. En la sección 4 presentaremos resultados numéricos con los dos modelos que describen el fenómeno físico y con el análisis de los resultados concluirá en artículo.

2. Modelo físico

Para la descripción del problema de interacción llama/torbellino, vamos a considerar las ecuaciones de conservación de la Mecánica de Fluidos aplicadas a especies reactivas.

1. La ecuación de continuidad y conservación de cantidad de movimiento se puede escribir como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (1)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}} + \rho \mathbf{f}_m, \quad (2)$$

donde $\mathbf{u}(ms^{-1})$ es la velocidad, y $\rho(kgm^{-3})$ es la densidad del fluido. $\rho \mathbf{f}_m$ representan las fuerzas másicas, que supondremos despreciables en este fenómeno. $\bar{\bar{\tau}}(Nm^{-2})$ es el tensor de tensiones que hay que modelizar dependiendo del comportamiento del fluido. Se considerará que la reacción química sucede en fase gaseosa con un comportamiento newtoniano y a números de Mach mucho menores que la unidad, por lo tanto la divergencia del tensión de tensiones toma la forma:

$$\nabla \cdot \bar{\bar{\tau}} = -\nabla p + \nabla \cdot \left[\mu(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \right],$$

donde $\mu(kgm^{-1}s^{-1})$ es la viscosidad dinámica del fluido y p son pequeñas correcciones hidrodinámicas a la presión termodinámica $P_0 = 1atm$ que se considera constante.

2. Ecuación de conservación de la masa de cada una de las especies químicas $i = 1, \dots, I$ que se mezclan y reaccionan:

$$\rho \left(\frac{\partial Y_i}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla Y_i \right) = -\nabla \cdot \mathbf{j}_i + \dot{m}_i, \quad (3)$$

donde $Y_i(kg_i/kg)$ es la fracción másica y $\mathbf{j}_i(kgm^{-2}s^{-1})$ es el flujo de difusión másica de la especie i . Tanto las fracciones másicas como el flujo de difusión deben satisfacer ciertas condiciones de compatibilidad

$$\sum_{i=1}^I Y_i = 1, \quad \sum_{i=1}^I \mathbf{j}_i = 0,$$

que hace que solamente sea necesario resolver $I - 1$ ecuaciones (3), ya que la última especie puede ser calculada como $Y_I = 1 - \sum_{i=1}^{I-1} Y_i$. El flujo de difusión másica se puede modelizar como:

$$\mathbf{j}_i = \rho Y_i \mathbf{V}_{di}, \quad (4)$$

donde $\mathbf{V}_{di}(ms^{-1})$ es la velocidad de difusión de la especie i en la mezcla. Por otro lado, $\dot{m}_i(kgm^{-3}s^{-1})$ representa la creación o destrucción de masa de la especie i debido a la reacción química. Las expresiones definitivas para \mathbf{V}_{di} y para \dot{m}_i se especificarán más adelante, cuando hablemos de los modelos I y II

3. La última ecuación diferencial será la ecuación de conservación de la energía, que puede escribirse:

$$\rho \left(\frac{\partial h}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla h \right) = -\nabla \cdot \mathbf{q}, \quad (5)$$

donde $h(J/kg)$ es la entalpía y $\mathbf{q}(Jm^{-2}s^{-1})$ es el flujo de calor entre unas partes del fluido y otras. El flujo de calor se puede modelizar utilizando la ley de Fourier generalizada que incluye el flujo de calor por reacción química

$$\mathbf{q} = -\rho c_p D_T \nabla T + \sum_{i=1}^I h_i \mathbf{j}_i. \quad (6)$$

El primer término está relacionado por el calor de conducción, proporcional al gradiente de la temperatura, a $c_p(Jkg^{-1}K^{-1})$ calor específico a presión constante, y a $D_T(m^2s^{-1})$

coeficiente cinemático de difusividad térmica. El segundo término está relacionado con el calor de reacción química, y $h_i(J/kg_i)$ representa la entalpía de cada especie química. La relación entre entalpía y calor específico de la mezcla, con los valores asociados a cada una de las especies, está dado por las siguientes expresiones:

$$h = \sum_{i=1}^I h_i Y_i, \quad c_p = \sum_{i=1}^I c_{pi} Y_i \quad \text{y} \quad dh_i = c_{pi} dT \quad (7)$$

Las ecuaciones (1)-(7) están escritas en forma dimensional, pero suele ser más útil presentarlas sin dimensiones para que aparezcan explícitamente los parámetros adimensionales relevantes en nuestro problema. Como hemos comentado en la introducción, vamos a ilustrar el funcionamiento del algoritmo adaptativo anisótropo con un ejemplo de combustión en el que una llama de difusión, sometida a estiramiento, es atravesada por un vórtice anular (Figura 1). Este problema está caracterizado por la velocidad de deformación que sufre la llama sin perturbar $A_0(s^{-1})$, por el radio del vórtice $r_0(m)$, y por la intensidad del vórtice que está representada por su circulación $\Gamma(m^2 s^{-1})$. Esta intensidad del vórtice generará un estiramiento extra a la llama de difusión, dado por $A_\Gamma = \Gamma/(2r_0^2)$, que puede ocasionar la extinción local de la llama si se supera el valor crítico de la velocidad de deformación de extinción A_{ext} . Ésta depende de la temperatura, así como de la composición de combustible y oxidante en las corrientes frescas de alimentación T_0 , $Y_{F0}(kg_F/kg)$, $Y_{O_2A}(kg_{O_2}/kg)$, respectivamente. Con los parámetros anteriores, y junto con las propiedades termodinámicas de la corriente de oxidante, aire a la presión $P_0 = 1atm$ y temperatura $T_0 = 300K$ (densidad ρ_A , viscosidad μ_A , coeficiente de difusión térmica D_{TA} y calor específico c_{pA}) podemos escribir las ecuaciones adimensionalizadas como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho'}{\partial t'} + \nabla' \cdot (\rho' \mathbf{u}') &= 0, \\ \rho' \left(\frac{\partial \mathbf{u}'}{\partial t'} + (\mathbf{u}' \cdot \nabla') \mathbf{u}' \right) &= -\nabla p' + \frac{Pr}{Pe} \nabla \cdot [\mu' (\nabla \mathbf{u}' + \nabla \mathbf{u}'^T)], \\ \rho' \left(\frac{\partial Y_i}{\partial t'} + \mathbf{u}' \cdot \nabla' Y_i \right) &= \frac{-1}{Pe} \nabla \cdot [\rho' Y_i \mathbf{V}'_{di}] + \mathcal{R} \dot{m}'_i, \quad \forall i = 1, \dots, I-1, \\ \rho' \left(\frac{\partial h'}{\partial t'} + \mathbf{u}' \cdot \nabla' h' \right) &= \frac{1}{Pe} \nabla' \cdot [\rho' c'_p D'_T \nabla' T'] - \frac{1}{Pe} \nabla' \cdot \left[\sum_{i=1}^I \rho' Y_i h'_i \mathbf{V}'_{di} \right] \end{aligned} \quad (8)$$

donde las variables adimensionalizadas serían:

$$t' = tA_0, \quad \mathbf{x}' = \mathbf{x}/r_0, \quad \mathbf{u}' = \mathbf{u}/(A_0 r_0), \quad p' = p/(\rho_A A_0^2 r_0^2), \quad T' = T/T_0,$$

$$\rho' = \rho/\rho_A, \quad \mu' = \mu/\mu_A, \quad D'_T = D_T/D_{TA}, \quad c'_{pi} = c_{pi}/c_{pA},$$

$$h'_i = h_i/(c_{pA} T_0), \quad \mathbf{V}'_{di} = \mathbf{V}_{di} r_0/D_{TA}, \quad \dot{m}'_i = \dot{m}'_i/(\rho_A A_{ext}).$$

Lo importante de la adimensionalización es que aparecen explícitamente en las ecuaciones los parámetros adimensionales que determinan las distintas soluciones del problema. En la ecuación de cantidad de movimiento aparece el número de Prandtl $Pr = \mu_A/(\rho_A D_{TA})$, que sólo depende de las propiedades termodinámicas del aire ($Pr = 0.72$), y el número de Peclet $Pe_0 = A_0 r_0^2/D_{TA}$. Es importante hacer notar que la relación $Pe_0/Pr = \rho_A U_0 r_0/\mu_A$ representa el número de Reynolds del problema. En la ecuación de conservación de las

especies químicas junto con el número de Peclet aparece la robustez de la llama $\mathcal{R} = A_{ext}/A_0$, que representa lo lejos que está de la extinción. Una llama con $\mathcal{R} \gg 1$ será una llama muy robusta, que será muy difícil de apagar, mientras que una llama con $\mathcal{R} \gtrsim 1$ se podrá llegar a extinguir con vórtices de poca intensidad.

Finalmente, para que el problema esté bien definido, habría que añadirle condiciones iniciales y de contorno, que definimos a continuación.

2.1. Dominio y condiciones de contorno

El dominio de integración de la ecuación será un cilindro con $0 \leq r' \leq r'_{\text{máx}}$ y $x'_{\text{mín}} < x' < x'_{\text{máx}}$, siendo r' y x' las coordenadas adimensionales correspondientes a la dimensión radial y axial, respectivamente. Como puede verse en el esquema de la Figura 1, la llama de difusión se encuentra en el plano $x' = 0$ mientras que el aire viene de la parte inferior $x' = x'_{\text{mín}}$ con concentración másica $Y_{O_2A} = 0.23$; la mezcla de combustible proviene de la parte superior $x' = x'_{\text{máx}}$ con concentración $Y_F = Y_{F0}$. Ambas corrientes se encuentran a temperatura $T' = T/T_0 = 1$.

Lejos de la llama y del vórtice, $|x'| \gg 0$, impondremos condiciones Dirichlet para las ecuaciones, fijando el valor de las concentraciones de las corrientes de alimentación, la temperatura, y la velocidad que se corresponderá con la configuración axisimétrica alrededor de un punto de remanso

$$x' = x'_{\text{mín}} : \begin{cases} (u'_x, u'_r) = (r'/2, -x'_{\text{mín}}), \\ Y_{O_2} = Y_{O_2A}, \quad Y_{N_2} = 1 - Y_{O_2A}, \quad Y_i = 0 \quad \forall i \neq O_2, N_2, \\ T' = 1. \end{cases} \quad (9)$$

$$x' = x'_{\text{máx}} : \begin{cases} (u'_x, u'_r) = (\rho'_F)^{-1/2} (r'/2, x'_0 - x'_{\text{mín}}), \\ Y_F = Y_{F0}, \quad Y_{N_2} = 1 - Y_{F0}, \quad Y_i = 0 \quad \forall i \neq F, N_2, \\ T' = 1. \end{cases} \quad (10)$$

En (10) $\rho'_F = \rho_F/\rho_A$ es el cociente de densidades entre la corriente de alimentación de combustible y aire; $x'_0 \geq 0$ representa el aparente desplazamiento de la llama de difusión vista desde el lado del combustible, inducido por el desplazamiento de velocidades asociados a la expansión térmica de gases calientes. Además, x'_0 debe ser dato y debe estar recogido en la condición inicial.

Por otro lado, en las paredes laterales del dominio impondremos condiciones de contorno Neumann. Para ello, definimos allí los términos de transporte de cantidad de movimiento, difusión de masa y de calor

$$r' = r'_{\text{máx}} : \begin{cases} \bar{\tau}' \cdot \mathbf{n} = \begin{cases} (r'^2_{\text{máx}}/8 + (x' - x'_0)^2/2) \mathbf{n} & x'_0 < x', \\ r'^2_{\text{máx}}/8 \mathbf{n} & 0 < x' < x'_0, \\ (r'^2_{\text{máx}}/8 + x'^2/2) \mathbf{n} & x' < 0, \end{cases} \\ \mathbf{j}'_i \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \forall i, \\ \mathbf{q}' \cdot \mathbf{n} = 0, \end{cases} \quad (11)$$

donde \mathbf{n} es el vector normal apuntando hacia el exterior del dominio.

2.2. Condición inicial

Como condición inicial, vamos a considerar la configuración estacionaria de dos mezclas gaseosas enfrentadas de combustible y aire, que se mezclan y reaccionan simultáneamente con una llama de difusión situada en el plano $x' = 0$. La configuración estacionaria, cuya solución es un campo de velocidades $\mathbf{u}'_s = (u'_{r,s}, u'_{x,s})$, presión p'_s , temperatura T'_s , y fracciones másicas $Y'_{i,s}$ debe ser calculado previamente, para lo cual son totalmente válidas las ecuaciones (8) y las condiciones de contorno descritas anteriormente (9)-(11). El cálculo de la solución estacionaria puede realizarse de forma iterativa para determinar el parámetro x'_0 , imponiendo que el campo de presiones lejano para $r' = 0$, y $x' \rightarrow x'_{\text{máx}}$ debe valer $p' = (x' - x'_0)^2 / 2$.

Una vez que la configuración estacionaria de llama de difusión es conocida, se perturbará el campo de velocidades inicial con un vórtice anular que se mueve perpendicularmente a la llama desde el lado del aire hacia el lado del combustible. Como se ha indicado antes, el vórtice estará caracterizado por su intensidad (circulación Γ) y su tamaño (radio característico r_0 que tendrá el vórtice en el instante de tiempo $t = 0$ cuando cruza el plano $x = 0$). Bajo la hipótesis de que el número de Peclet $Pe_0 = r_0 A_0 / D_{TA}$ es elevado en nuestra configuración, puede considerarse que el campo de velocidades en el lado del aire es la suma directa de la velocidad del vórtice y la velocidad axisimétrica de punto de remanso de dos corrientes enfrentadas:

$$\begin{cases} u'_r = u'_{r,s} + \frac{\tilde{\Gamma}}{\pi r'_c} \left(\frac{r'_c}{2r'} \right)^{3/2} \left(\frac{x' - x'_c}{r'_c} \right) I_1(\mu), \\ u'_x = u'_{x,s} + \frac{\tilde{\Gamma}}{\pi r'_c} \left(\frac{r'_c}{2r'} \right)^{3/2} \left[\frac{r'}{r'_c} I_1(\mu) - I_0(\mu) \right]. \end{cases} \quad (12)$$

El único parámetro libre en estas ecuaciones es la intensidad adimensional del vórtice $\tilde{\Gamma} = \Gamma / (2r_0^2 A_0)$, siendo el resto de parámetros los definidos en [11] y en su apéndice.

Hay que hacer notar que este campo de velocidades se ha obtenido de forma exacta en una zona de densidad y difusividad constante, suficientemente lejos de la zona de influencia de la llama de difusión. Por lo tanto, la simulación numérica ha de empezar en un instante para el que el vórtice se encuentre a media distancia entre la frontera inferior y la llama $x' = x'_{\text{min}}/2$ ($t'_{\text{min}} = 0.5$), y terminará cuando la interacción del vórtice con la llama haya cesado ($t'_{\text{máx}} = 1.0$).

3. Método numérico

En esta sección vamos a describir el método numérico adaptativo que será utilizado para calcular la solución del problema definido por las leyes de conservación adimensionales dadas en (8). La solución numérica de las ecuaciones de Navier-Stokes, acopladas con las ecuaciones de conservación de masa de las especies químicas y de la energía, que pueden ser altamente no lineales, constituye un problema exigente para los métodos numéricos convencionales. En muchos fenómenos físicos descritos por estas ecuaciones es típico que aparezcan capas límite, regiones en las que la solución exhibe grandes gradientes o presenta una forma irregular. Por todo ello, el uso de estrategias numéricas adaptativas para describir procesos fluidodinámicos es de gran interés.

La idea principal de estos métodos numéricos es adaptar el dominio de integración a las características de la solución. Para realizar esta tarea, se necesita en primer lugar calcular un indicador del error cometido en la discretización numérica, que nos permita discriminar qué elementos deben ser refinados o engrosados. Todo ello con el fin de crear un mallado espacial óptimo, con el mínimo número de elementos, donde el error espacial esté equilibrado en cada uno de los elementos sin importar el tamaño de los mismos.

Por todo lo dicho anteriormente, en un algoritmo adaptativo se pueden distinguir 3 etapas: 1) resolver numéricamente las ecuaciones del fenómeno físico, 2) crear un indicador del error basado en la solución numérica actual, y 3) definir un nuevo mallado espacial, más acorde a la forma de la solución, manteniendo la precisión del método numérico por debajo de cierta tolerancia. A continuación presentaremos y daremos algunos detalles de cada una de estas tres etapas.

3.1. Resolución numérica de las ecuaciones

Todas las ecuaciones que vamos a resolver en (8) tienen una expresión parecida, al ser todas ellas ecuaciones de convección-reacción-difusión. Por lo tanto, para explicar el método numérico vamos a considerar la siguiente ecuación general para la variable dependiente $c(\mathbf{x}, t)$:

$$\begin{cases} \frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla c = F(c, \mathbf{x}, t) & \text{in } \Omega \times [0, T] \\ c(\mathbf{x}, 0) = c^0(\mathbf{x}) & \text{condición inicial.} \\ Bc(\mathbf{x}, t) = 0 & \text{condición de contorno.} \end{cases} \quad (13)$$

donde el lado derecho de la ecuación, $F(c, \mathbf{x}, t)$, es una función genérica que puede contener la solución $c(\mathbf{x}, t)$, así como valores de su derivada espacial. Por ejemplo, en el caso particular de la ecuación de conservación de la fracción másica de las especies químicas (3), la función F representa la suma del transporte difusivo y el término de reacción química.

Para obtener la solución numérica de la ecuación anterior (13), se divide el intervalo temporal $\bar{I} := [0, T]$ en N_t subintervalos $I_n := (t_{n-1}, t_n]$ tal que $N_t \Delta t = T$ (consideraremos que todos los intervalos tienen la misma longitud, para simplificar la explicación). La discretización espacial hará uso del método de elementos finitos, cuya principal ventaja para el algoritmo adaptativo es que permite trabajar con mallados no estructurados de elementos triangulares en 2D y con elementos tetraédricos en 3D. Para ello, en cada subintervalo de tiempo I_n se construye una triangulación regular del dominio $\mathbb{T}_h^n = \{K_j \subset \mathbb{R}^d, 1 \leq j \leq NE_n\}$, con NE_n el número de elementos que forman la triangulación. Teniendo la discretización espacial realizada, podemos definir el espacio de elementos finitos conforme V_h^n asociado, que estará definido por polinomios de orden m continuos a trozos en cada elemento de la triangulación espacial \mathbb{T}_h^n . En este espacio debe definirse la solución numérica $c_h^n(\mathbf{x})$ (notación abreviada de $c_h(\mathbf{x}, t_n)$) en el tiempo t_n como

$$c_h^n(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{N_h^n} C_i^n \varphi_i^n(\mathbf{x}), \quad (14)$$

donde $C_i^n = c_h^n(\mathbf{x}_i)$; \mathbf{x}_i siendo un nodo de los N_h^n que componen el mallado \mathbb{T}_h^n ; y $\{\varphi_i^n\}$ es el conjunto de funciones base de V_h^n que satisfacen $\varphi_i^n(\mathbf{x}_j) = \delta_{ij}$ (con δ_{ij} la delta de Kronecker).

Con las consideraciones anteriores, la solución numérica $c_h(\mathbf{x}, t_n)$ de (13) en el instante t_n se calculará a partir de la solución numérica previa $c_h(\mathbf{x}, t_{n-1})$ utilizando el algoritmo semilagrangiano que describiremos a continuación. Para ello, se integrará la ecuación (13) a lo largo de las curvas características $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t_n; t)$ del operador derivada material $D()/Dt = \partial()/\partial t + \mathbf{u} \cdot \nabla()$, siendo $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t_n; t)$ la posición en el instante temporal t de una hipotética partícula fluida (moviéndose con velocidad $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$) que llegará a alcanzar el punto del mallado \mathbf{x} en el instante t_n . De esta forma, la ecuación original, integrada a lo largo de las curvas características puede transformarse en el subintervalo de tiempo $I_n := (t_{n-1}, t_n]$ en

$$\begin{cases} \frac{\partial c(\mathbf{X}(\mathbf{x}, t_n; t), t)}{\partial t} = F(c(\mathbf{X}(\mathbf{x}, t_n; t), t), \mathbf{X}(\mathbf{x}, t_n; t), t) & \text{in } \Omega \times (t_{n-1}, t_n] \\ c_h^{n-1}(\mathbf{X}(\mathbf{x}, t_n; t_{n-1})) & \text{condición inicial.} \end{cases} \quad (15)$$

Como puede verse en la ecuación (15), han de considerarse dos etapas para obtener la solución $c(\mathbf{x}, t_n) = c(\mathbf{X}(\mathbf{x}, t_n; t_n), t_n)$ en el instante t_n . La primera etapa consiste en calcular la condición inicial $c_h^{n-1}(\mathbf{X}(\mathbf{x}, t_n; t_{n-1}))$ como perteneciente al espacio de elementos finitos V_h^n , y en la segunda etapa hay que resolver un problema de reacción-difusión donde los términos convectivos han desaparecido. Los esquemas semilagrangianos tienen la ventaja de desacoplar las ecuaciones de Navier-Stokes de las ecuaciones de conservación de especies y energía, convirtiendo el primero en un problema de Stokes y los segundos en ecuaciones puramente parabólicas. Las particularidades de cada una de las etapas del esquema semilagrangiano se exponen a continuación.

3.1.1. Etapa de convección: calcular $\bar{c}_h(\mathbf{x}, t_{n-1})$

Introduciremos aquí la notación $\bar{c}_h^{n-1}(\mathbf{x}) = \bar{c}_h(\mathbf{x}, t_{n-1}) \in V_h^n$ para representar la solución numérica en el instante $t = t_{n-1}$ que más se aproxima a la solución evaluada en los pies de las curvas características $c_h^{n-1}(\mathbf{X}(\mathbf{x}, t_n; t_{n-1}))$ de la solución numérica $c_h^{n-1}(\mathbf{x}) \in V_h^{n-1}$. Para realizar esta tarea, necesitamos en primer lugar calcular el pie de las curvas características $\mathbf{X}(\mathbf{x}_i, t_n; t_{n-1})$ (que podemos denotar más brevemente como $\mathbf{X}^{n-1}(\mathbf{x}_i)$) para todos los nodos \mathbf{x}_i de la triangulación y después de eso, proyectar la solución en el espacio de elementos finitos V_h^n .

1. La primera parte se realiza resolviendo el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias hacia atrás en el tiempo:

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{X}(\mathbf{x}, t_n; t)}{dt} = \mathbf{u}(\mathbf{X}(\mathbf{x}, t_n; t), t) & t_{n-1} \leq t < t_n \\ \mathbf{X}(\mathbf{x}, t_n; t_n) = \mathbf{x} \end{cases} \quad (16)$$

La resolución se hará con un esquema Runge-Kutta de segundo orden, orden de convergencia que está garantizado al conocer la velocidad $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ en los instantes previos t_{n-1} y t_{n-2} [2].

2. La segunda parte consiste en definir la solución $\bar{c}_h^{n-1}(\mathbf{x}_i)$ en cada uno de los nodos \mathbf{x}_i del mallado actual, ya que así se puede construir la solución de elementos finitos como perteneciente a V_h^n tal y como se indica en la formula (14). Sin embargo, en general la

solución $c_h^{n-1}(\mathbf{X}^{n-1}(\mathbf{x}))$ no pertenecerá al espacio de elementos finitos V_h^n , así que hay que construir una solución $\bar{c}_h^{n-1}(\mathbf{x})$ que se aproxime a la anterior. Para ello existen varias estrategias; una revisión de los métodos existentes, así como una comparación entre ellos para mallados isotropos y regulares puede encontrarse en [4]. Aquí comentaremos dos de estas estrategias de aproximación, que serán utilizadas en los ejemplos numéricos de adaptación anisótropa.

- a) Metodo de interpolación semilagrangiano: la solución $\bar{C}_i^{n-1} = \bar{c}_h^{n-1}(\mathbf{x}_i)$, en cada uno de los nodos de la actual triangulación, se obtiene por la clásica fórmula de interpolación de Lagrange de la solución conocida $c_h^{n-1}(\mathbf{x})$ en los puntos $\mathbf{X}^{n-1}(\mathbf{x}_i)$. Es decir:

$$\bar{C}_i^{n-1} = c_h^{n-1}(\mathbf{X}^{n-1}(\mathbf{x}_i)) = \sum_{j=1}^{N_h^{n-1}} C_j^{n-1} \varphi_j^{n-1}(\mathbf{X}^{n-1}(\mathbf{x}_i)), \quad (17)$$

donde $\{\varphi_j^{n-1}\}$ (con $j = 1, \dots, N_h^{n-1}$) es el conjunto de funciones base del espacio de elementos finitos V_h^{n-1} definido por el mallado \mathbb{T}_h^n en el instante anterior t_{n-1} .

- b) Método de proyección de Galerkin: se construirá la mejor aproximación en la norma L^2 de $c_h^{n-1}(\mathbf{X}^{n-1}(\mathbf{x}))$ en el espacio V_h^n . Para ello habría que resolver el sistema lineal de ecuaciones

$$\begin{aligned} \int \bar{c}^{n-1}(\mathbf{x}) \varphi_j^n(\mathbf{x}) d\Omega &= \int c_h^{n-1}(\mathbf{X}^{n-1}(\mathbf{x})) \varphi_j^n(\mathbf{x}) d\Omega \\ \sum_{i=1}^{N_h^n} m_{ji} \bar{C}_i^{n-1} &= \int_{\Omega} c_h^{n-1}(\mathbf{X}^{n-1}(\mathbf{x})) \varphi_j^n(\mathbf{x}) d\Omega \end{aligned} \quad (18)$$

donde $m_{ij} = \int_{\Omega} \varphi_i^n(\mathbf{x}) \varphi_j^n(\mathbf{x}) d\Omega$ son los elementos de la matriz de masas del espacio V_h^n . La integral del lado derecho debe ser calculada dividiéndola en las contribuciones de cada elemento $K \in \mathbb{T}_h^n$ y luego aplicando reglas de cuadratura a cada uno de esos elementos.

La segunda aproximación, la proyección de Galerkin, da mejores resultados que la interpolación como veremos en los ejemplos. Para elementos finitos lineales, los resultados mejoran espectacularmente ya que la interpolación lineal es altamente difusiva.

3.1.2. Etapa de reacción-difusión: calcular $c_h(\mathbf{x}, t_n)$

Si llamamos $\bar{c}_h(\mathbf{x}, t) \in V_h^n$ a la solución numérica en el instante $t_{n-1} \leq t \leq t_n$, la ecuación (15) se convertiría en un problema puramente parabólico

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{c}_h(\mathbf{x}, t)}{\partial \tau} &= F(\bar{c}_h(\mathbf{x}, t), \mathbf{X}(\mathbf{x}, t_n; t), t) \quad \text{in } \Omega \times (t_{n-1}, t_n] \\ \bar{c}_h(\mathbf{x}, t_{n-1}) &\text{ dato de la etapa semilagrangiana.} \end{aligned}$$

El objetivo sería calcular $\bar{c}_h(\mathbf{x}, t_n) = c_h(\mathbf{x}, t_n)$ que coincide con la solución numérica al problema original (13) en el instante t_n . Por congruencia con las discretizaciones tanto

espaciales como temporales llevadas a cabo en la etapa semilagrangiana anterior, la discretización espacial se hará con elementos finitos de orden m , y para la discretización temporal utilizaremos esquemas temporales de segundo orden, al igual que los utilizados para calcular el pie de las curvas características. Si las ecuaciones que tuviéramos que resolver fueran lineales emplearíamos un esquema BDF (*backward differentiation formula*) de segundo orden. Sin embargo, para sistemas con altas no linealidades, como son aquellos donde aparecerán términos de reacción química o coeficientes de difusión, se prefiere utilizar un esquema de segundo orden Runge-Kutta-Chebyshev explícito [15], con número de etapas variable. El número de etapas usadas en este método es elegida dinámicamente en cada paso de tiempo, dependiendo de las características del mallado y del paso de tiempo, para preservar la estabilidad del método explícito.

3.2. Indicador del error

En este apartado explicaremos el cálculo del indicador de error que se utilizará para definir el mallado óptimo en el instante t_n . En primer lugar, el error que calculamos es un error de truncación o error local cometido en cada subintervalo de tiempo; por lo tanto, más que un estimador del error, se trata de un indicador del error. También hay que resaltar el hecho de que vamos a considerar mallados anisótropos ya que pueden adecuarse mejor a la forma de la solución. Por lo tanto, además de definir el tamaño de los elementos también habrá que definir la forma y la orientación de los mismos.

Para realizar lo anteriormente expuesto, vamos a considerar la formulación de un error a priori y de un error a posteriori. El error a priori valdrá para definir la forma y orientación de los nuevos elementos, mientras que el error a posteriori servirá para definir el tamaño de los elementos, como veremos en la sección siguiente.

1. Del análisis de error a priori entre una función $c^n \in H^2(K)$ y $\Pi_h(c^n)$, que es la aproximación por interpolación de Lagrange en un espacio de elementos finitos lineales V_h^n , se conoce el siguiente resultado

$$\|c^n - \Pi_h(c^n)\|_{L^2(K)} \leq C_2 |K|^{2/d} \left[|K| \sum_{i,j=1}^d s_{i,K} s_{j,K} \left(\mathbf{r}_{i,K}^T \bar{H}_K(c^n) \mathbf{r}_{j,K} \right)^2 \right]^{1/2}, \quad (19)$$

que puede verse en [6]. En (19) $|K|$ representa el tamaño del elemento, $\mathbf{r}_{i,K}$ son los vectores que en un espacio de dimensión d ($d = 2$ ó 3 para nosotros) orientan al elemento, y $s_{i,K}$ son los factores de forma que definen la anisotropía del mismo. Los factores $s_{i,K}$ están definidos en función de las longitudes $\lambda_{i,K}^2$ del elipsoide que inscribe al elemento

$$s_{i,K} = \lambda_{i,K}^2 \left(\prod_{j=1}^d \lambda_{j,K} \right)^{-2/d} \quad \text{para } i = 1, \dots, d, \quad (20)$$

con $s_{1,K} \geq \dots \geq s_{d,K} > 0$ y satisfaciendo $\prod_{i=1}^d s_{i,K} = 1$. Estas cantidades $s_{i,K}$ miden la deformación del elemento con respecto al caso isótropo (donde $s_{i,K} = 1$, $i = 1, \dots, d$). En el caso de $2D$ los factores de forma son $s_{1,K} = 1/s_{2,K} = \lambda_{1,K}/\lambda_{2,K}$ y un esquema en esa dimensión puede verse en la Figura 2.

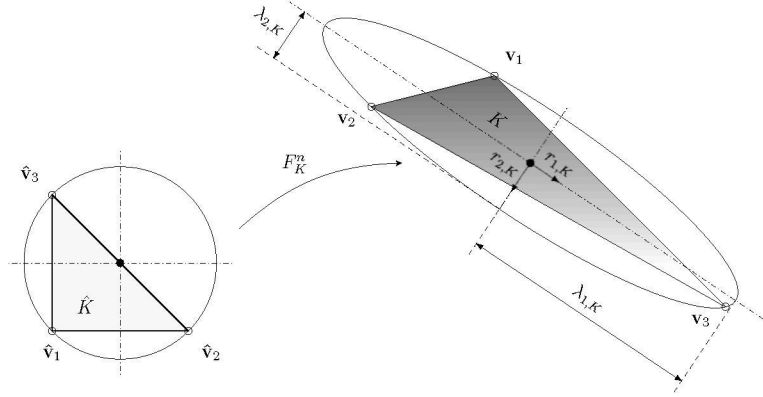


Figura 2: Parámetros característicos de un elemento anisótropo

Por último comentar que el error a priori aparte de depender de consideraciones geométricas del elemento, también depende de $\overline{H}_K(c^n)$ que es el valor medio de la matriz Hessiana de la solución $c^n(\mathbf{x})$ en el elemento K del mallado. La fórmula (19), como ya veremos más adelante, nos servirá para calcular la forma y la orientación óptima de los elementos del mallado.

2. También realizaremos un cálculo de error a posteriori para evaluar el error espacial cometido en la discretización por elementos finitos en el intervalo $I_n := (t_{n-1}, t_n]$. Un análisis riguroso del error debería considerar los dos etapas mostradas en el algoritmo anterior: la etapa convectiva y la etapa de problema de reacción-difusión. Sin embargo, el indicador de error que vamos a introducir solamente estará basado en el error espacial cometido en el cálculo de la etapa convectiva. Por lo tanto, el error calculado solamente sería válido en aquellos problemas que tengan convección dominante, que por otro lado son los más comunes en la mayoría de las aplicaciones de la Mecánica de Fluidos. El error espacial en la etapa convectiva puede evaluarse midiendo la diferencia entre $c_h^n(\mathbf{X}^{n-1}(\mathbf{x}))$ y su aproximación $\tilde{c}_h^n(\mathbf{x}) \in V_h^n$ en la norma L^2 .

$$\eta_K^n = \left(\int_K \left[c_h^n(\mathbf{X}^{n+1}(\mathbf{x})) - \tilde{c}_h^n(\mathbf{x}) \right]^2 d\Omega \right)^{1/2} \quad \text{con } \eta^n = \left(\sum_K (\eta_K^n)^2 \right)^{1/2}. \quad (21)$$

Es conveniente hacer notar que si se quiere evaluar el error en problemas multivariantes, como podría ser el nuestro, puede definirse *ad-hoc* una nueva variable $z^n = \varphi(c_1^n, c_2^n, \dots, c_I^n)$ que sea una combinación satisfactoria de todas las variables $c_i^n(\mathbf{x})$ del problema y calcular el error a priori y a posteriori asociado a esa nueva variable.

3.3. Definición de la triangulación óptima

A continuación presentamos cómo se realiza el cálculo de la triangulación óptima \mathbb{T}_h^{opt} en el instante t_n utilizando la expresión del indicador de error a priori (19) y el valor del indicador de error a posteriori calculado con (21). Nuestro interés es tener un mallado con el mínimo número de elementos, que satisfaga que el error a posteriori calculado esté por debajo de una determinada tolerancia, $\eta^n \leq Tol$. Si la solución numérica $c_h^n(\mathbf{x})$ en el instante t_n no

satisface ese criterio, la solución debe ser recalculada en el nuevo mallado $\mathbb{T}_h^n = \mathbb{T}_h^{opt}$. Sin embargo, si el criterio se satisface, será el mallado en el instante de tiempo siguiente t_{n+1} el que será igualado al mallado óptimo $\mathbb{T}_h^{n+1} = \mathbb{T}_h^{opt}$. Esta operación evitará recalcular la solución en la mayoría de los casos.

En primer lugar, mirando la expresión del indicador de error a priori (19), podríamos afirmar que en el mallado óptimo \mathbb{T}_h^{opt} el tamaño de los elementos interesa que sea máximo, manteniendo constante el error de interpolación lineal en cada elemento. Así, la orientación $\mathbf{r}_{i,K}^{opt}$ y la forma $s_{i,K}^{opt}$ de los triángulos óptimos puede obtenerse del siguiente problema de minimización:

$$\min_{s_{i,K}, \mathbf{r}_{i,K}} \left\{ \sum_{i,j=1}^d s_{i,K} s_{j,K} \left(\mathbf{r}_{i,K}^T \overline{H}_K(c^n) \mathbf{r}_{j,K} \right)^2 \right\}, \quad (22)$$

con las restricciones $s_{1,K} \geq \dots \geq s_{d,K}$, y $\mathbf{r}_{i,K} \cdot \mathbf{r}_{j,K} = \delta_{ij}$ (con δ_{ij} la delta de Kronecker). Como puede verse en [6], la solución de este problema es:

$$s_{i,K}^{opt} = \left(\prod_{i=1}^d |g_{i,K}| \right)^{1/d} |g_{d+1-i,K}^{-1}|, \quad \mathbf{r}_{i,K}^{opt} = \mathbf{l}_{d+1-i,K}, \quad \text{para } i = 1, \dots, d$$

donde $\mathbf{l}_{i,K}$ y $g_{i,K}$ es la pareja autovector-autovalor (with $|g_{1,K}| \geq |g_{2,K}|$) de la matriz Hessiana $H_K(c^n)$ de $c^n(\mathbf{x})$ que puede ser evaluada a través de solución numérica $c_h^n(\mathbf{x})$, tomando la formulación débil de cada una de las derivadas que aparecen en la matriz como se indica en [5].

Por otro lado, el tamaño óptimo del elemento, para satisfacer $\eta^n \leq Tol$ con el mínimo número de elementos posible, está determinada por la siguiente expresión mostrada en [6]:

$$|K^{opt}| = |K| \left(\frac{Tol^2}{\sum_{K \in \mathbb{T}_h^n} (\eta_K^n)^{1/(\beta+1)}} \right)^{1/\beta} (\eta_{s,K}^n)^{-2/(\beta+1)} \quad (23)$$

válida para elementos finitos de orden m , siendo $\beta = (m+1)/d$ el factor de convergencia del error espacial en la norma L^2 con el tamaño de los elementos.

Toda la información correspondiente a la forma $s_{i,K}^{opt}$, a la orientación $\mathbf{r}_{i,K}^{opt}$, y al tamaño $|K^{opt}|$ puede recogerse en un tensor métrico $M_{\mathbb{T}_h}^{opt}$, cuya construcción, a partir de los parámetros anteriores, se explica detalladamente en [6]. Finalmente, se dispone de un generador de mallas anisótropo que creará el nuevo mallado siguiendo las especificaciones del tensor métrico proporcionado. En nuestros ejemplos utilizaremos dos generadores de malla de libre distribución: el primero es el ‘BAMG’ [9] y trabaja con mallados de triángulos en 2D, mientras que el otro se llama ‘Mmg3D’ [8], siendo válido para mallados 3D de tetraedros.

4. Experimentos numéricos

En esta última sección vamos a considerar dos modelos de complejidad creciente para la simulación del fenómeno físico que queremos estudiar. El primer modelo, muy simplificado, supondrá densidad constante, coeficientes de difusión constantes y reacción química infinitamente rápida. Este Modelo I, nos servirá para estudiar numéricamente las propiedades

del método numérico adaptativo, tanto en dos como en tres dimensiones. Finalmente se considerará un modelo más complejo (Modelo II), para el caso de combustión de mezclas de hidrógeno/aire, el cual permitirá comparar nuestros resultados con valores experimentales. Una vez que el modelo está definido, solamente quedarán como parámetros independientes para realizar las simulaciones los siguientes números adimensionales: el número de Peclet Pe_0 , la intensidad del vórtice $\tilde{\Gamma}$, y la robusted de la llama \mathcal{R} :

$$Pe_0 = A_0 r_0^2 / D_{TA}, \quad \tilde{\Gamma} = \Gamma / (2r_0^2 A_0), \quad \mathcal{R} = A_{ext} / A_0.$$

4.1. Modelo I

Se considerarán densidad, viscosidad, coeficiente de difusión térmica y calor específico constantes en todo el dominio e iguales a los del aire:

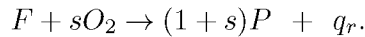
$$\rho' = 1, \quad \mu' = 1, \quad D'_T = 1, \quad c'_p = 1.$$

Para la velocidad de difusión de las especies químicas se supondrá válida la ley de Fick $\mathbf{V}_{d_i} = -D_i \nabla X_i / X_i$ a la que añadiremos la hipótesis de que los coeficientes de difusión son constantes e iguales a la difusividad térmica del aire, y que el peso molecular de todas las especies es similar. Con todo esto, se puede escribir el flujo de difusión másico como $\mathbf{j}_i = -\rho D_{TA} \nabla Y_i$.

Con las hipótesis anteriores se pueden manipular las ecuaciones de conservación de las especies químicas y de la energía en (8), pudiéndose escribir:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial Y_i}{\partial t'} + \mathbf{u}' \cdot \nabla' Y_i \right) &= \frac{1}{Pe_0} \Delta' Y_i + \mathcal{R} \dot{m}'_i, \\ \left(\frac{\partial T'}{\partial t'} + \mathbf{u}' \cdot \nabla' T' \right) &= \frac{1}{Pe_0} \Delta' T' - \mathcal{R} q'_r \dot{m}'_F, \end{aligned} \quad (24)$$

donde solamente nos quedaría por modelizar los términos de cinética química entre el combustible y el oxígeno. Para ello consideraremos en este primer modelo que la reacción tiene lugar en una etapa infinitamente rápida



Aquí, una masa s de oxígeno O_2 es consumida, generando una energía térmica q_r y una masa $(1 + s)$ de Productos P por cada unidad de masa de combustible F que se quema. Ésta relación de \dot{m}'_i nos permite definir una nueva variable Z , llamada fracción de mezcla

$$Z = \frac{SY_F / Y_{F0} - Y_{O_2} / Y_{O_2A} + 1}{S + 1},$$

con $S = sY_{F0} / Y_{O_2A}$. Z seguiría una ecuación diferencial como las anteriores donde han desaparecido los términos altamente no lineales de reacción química. Sin embargo, se puede recuperar el valor de las variables originales del problema suponiendo reacción química infinitamente rápida (equivalente a suponer $\mathcal{R} \rightarrow \infty$) y aplicar la hipótesis de Burke-Shumann. Esto es, imponer que en la zona de reacción no pueden coexistir el combustible

y el oxidante, lo que se expresa matemáticamente con la ecuación $Y_F Y_{O_2} = 0$ en la zona de reacción y da como resultado las siguientes relaciones para Y_F , Y_{O_2} y la temperatura T

$$\left\{ \begin{array}{lll} T = 1 + \gamma \left(\frac{1-Z}{1-Z_s} \right), & \frac{Y_F}{Y_{F,0}} = \frac{1-Z}{1-Z_s}, & Y_{O_2} = 0, \quad \text{if } Z \geq Z_s, \\ T = 1 + \gamma \frac{Z}{Z_s}, & Y_F = 0, & \frac{Y_{O_2}}{Y_{O_2,A}} = 1 - \frac{Z}{Z_s}, \quad \text{if } Z < Z_s, \end{array} \right.$$

donde $\gamma = q_r Y_{F0} / (c_{pA} T_0 (1 + S))$ es el máximo incremento de temperatura que sufre el fluido en la zona reactiva, y el valor $Z = Z_s = 1/(S + 1)$ marca la zona estequiométrica de la llama de difusión. En la zona estequiométrica se alcanza la temperatura máxima de la llama $T_s = (1 + \gamma)T_0$ y las fracciones másicas de combustible y oxidante se hacen cero. Con todas estas consideraciones el problema termoquímico queda reducido a resolver la siguiente ecuación lineal de convección-difusión

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial Z}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla Z = \frac{1}{Pe_0} \Delta Z \quad \text{in } \Omega \times (0, T], \\ Z(x, 0) = Z^0(x) \quad \text{in } \Omega, \\ Z = 0 \text{ } x = x_{\min} \quad \text{and} \quad Z = 1 \text{ } x = x_{\max} \\ \partial Z / \partial r = 0 \quad r = r_{\max}. \end{array} \right.$$

en el que la condición inicial será la solución estacionaria de la llama sometida a un campo de velocidades axisimétrico, cuya solución analítica de acuerdo a las hipótesis simplificadoras del Modelo I

$$Z^0(x) = 1 - \frac{1}{2} \operatorname{erfc}[(Pe_0/2)^{1/2} x_2].$$

El campo de velocidades en este modelo simplificado, para el que se ha anulado la expansión térmica al considerar la densidad y todos los coeficientes de difusión constantes, sigue la expresión analítica que tomamos de [11] se encuentra definida por la ecuación (12) para todo instante de tiempo.

A continuación vamos a estudiar con este modelo las características del esquema adaptativo semilagrangiano, para interpolación de Lagrange y proyección Galerkin semilagrangiana, tanto para elementos finitos lineales $m = 1$, como cuadráticos $m = 2$. Para ello vamos a considerar el caso con Peclet $Pe_0 = 80$, $\tilde{\Gamma} = 20$ y robustez de llama $\mathcal{R} \rightarrow \infty$ (parámetros seleccionados del trabajo [11]).

En primer lugar consideraremos el estudio del fenómeno en una configuración axisimétrica en 2D y luego la misma situación en 3D. Mostraremos en estos ejemplos detalles de la solución y del mallado obtenido en distintos instantes de tiempo, así como la convergencia del método de elementos finitos adaptativo anisótropo en la norma L^2 con el número medio de elementos en la simulación ($e_{L^2} \propto \overline{NE}^\alpha$): Además, compararemos los valores experimentales de $\hat{\alpha}$ con los teóricos $\alpha = -(m + 1)/d$ que se obtienen del análisis del error a priori, para soluciones suaves.

4.1.1. Configuración axisimétrica 2D

En la Figura 3 representamos la posición de la llama por medio de las isocurvas de la solución Z en diferentes instantes de tiempo. Haciendo uso de la configuración axisimétrica,

se ha mostrado un detalle de la malla en la parte derecha de la figura para resaltar las buenas características del mallado anisótropo.

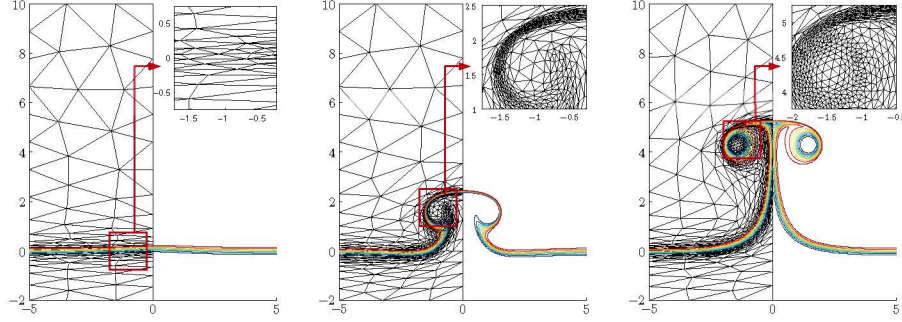


Figura 3: Isolineas de Z de 0.1 to 0.9 para el problema axisimétrico en 2D. Instantes de tiempo $t = -0.2$, $t = 0.2$ y $t = 0.8$

Con el proposito de analizar la eficiencia del método adaptativo se estudia su convergencia en el espacio, representando el error global en la norma L^2 de la solución obtenida en el instante final, para distintas tolerancias espaciales y un paso de tiempo $\Delta t = 1 \cdot 10^{-3}$ (de modo que el único error existente sea el espacial). En la Figura 4 mostramos la convergencia $e_{L^2} \propto \overline{NE}^\alpha$ obtenida para adaptación anisótropa para elementos finitos lineales y cuadráticos $m = 2$ en los casos de interpolación y proyección de Galerkin, observando que ambas siguen el comportamiento asintótico $\alpha = -(m + 1)/2$, pero siendo mucho mejor el caso de proyección.

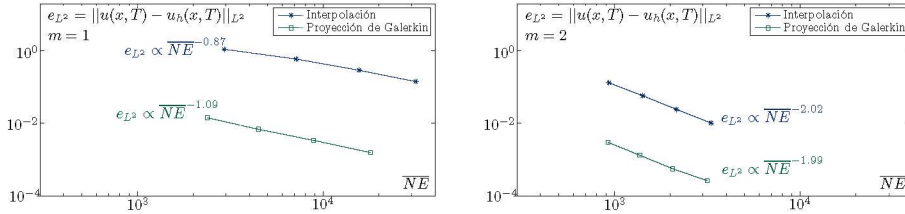


Figura 4: Convergencia en la norma L^2 del error en el caso axisimétrico 2D. Convergencia espacial para elementos lineales (izquierda) y para elementos cuadráticos (derecha) usando interpolación y proyección de Galerkin

4.1.2. Configuración 3D

Pasemos a analizar el caso tridimensional. Aunque en este problema la configuración axisimétrica sería equivalente, se pretende estudiar el comportamiento del esquema numérico y del mallador anisótropo en 3D. En la Figura 5 se ha representado la malla anisótropa para los mismos instantes de tiempo de la figura anterior.

Finalmente, la Figura 6 recoge los resultados para el error global e_{L^2} , en función del número medio de elementos empleados en la simulación. El paso de tiempo empleado en las simulaciones es $\Delta t = 4 \cdot 10^{-3}$, para considerar el error temporal despreciable. El valor

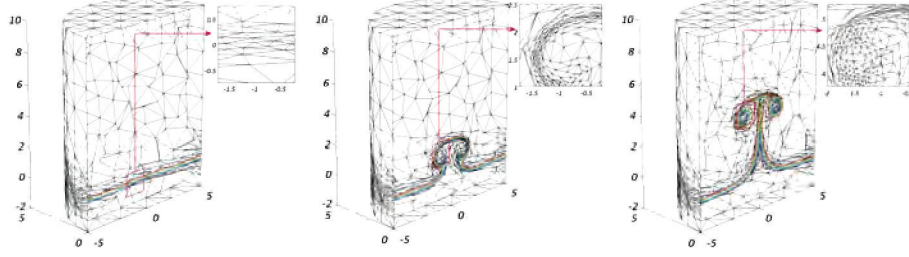


Figura 5: Adaptación anisótropa mostrada en un corte por el plano de simetría del dominio. Solución obtenida para los instantes $t = -0.2$, $t = 0.2$ y $t = 0.8$

teórico de la convergencia toma en 3D un valor $\alpha = -(m + 1)/3$. Puede verse como el caso $m = 1$ con interpolación lineal se obtienen resultados muy pobres, siendo el comportamiento con proyección de Galerkin de gran precisión y con unos resultados muy cercanos a la convergencia teórica.

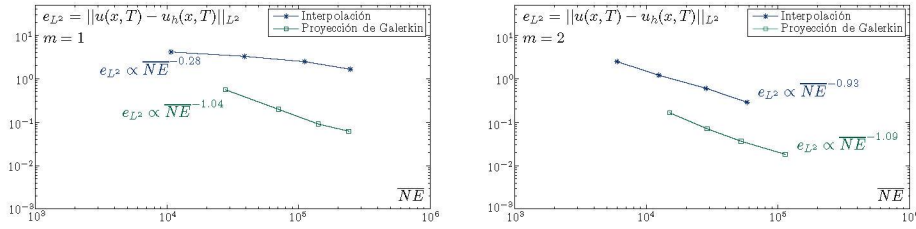


Figura 6: Convergencia en la norma L^2 del error en el caso 3D. Convergencia espacial para elementos lineales (izquierda) y para elementos cuadráticos (derecha) usando interpolación y proyección de Galerkin

4.2. Modelo II

Aquí consideraremos hipótesis más realistas para los coeficientes que aparecen en las ecuaciones de conservación (8), suponiendo que el combustible es H_2 con una concentración Y_{F0} en la corriente de alimentación.

- En primer lugar consideraremos que el fluido es un gas ideal, a presión $P_0 = 1atm$ prácticamente constante, y puede calcularse su densidad como

$$\rho' = \frac{W}{W_A} \frac{1}{T'},$$

donde $W = \left(\sum_{i=1}^I Y_i / W_i \right)^{-1}$ es la masa molecular de la mezcla y $W_A = 28.4g/mol$ es la masa molecular de la corriente fresca de aire.

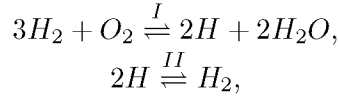
- La velocidad de difusión de las especies químicas (4) puede calcularse utilizando la ley de Fick generalizada, donde la velocidad de difusión tiene 3 contribuciones $\mathbf{V}_{di} =$

$\mathbf{V}_i^D + \mathbf{V}_i^T + \mathbf{V}_c$. La velocidad de difusión ordinaria \mathbf{V}_i^D , la velocidad de termodifusión (responsable del efecto Soret) \mathbf{V}_i^T y la velocidad de corrección \mathbf{V}_i^T para que la restricción $\sum_{i=1}^I \mathbf{j}_i = \mathbf{0}$ sea satisfecha.

$$\mathbf{V}_i'^D = -\frac{D_i'}{X_i} \nabla X_i, \quad \mathbf{V}_i'^T = \frac{D_i' \theta_i}{X_i} \frac{\nabla T}{T}, \quad \text{and } \mathbf{V}_c' = -\sum_{i=1}^I (Y_i \mathbf{V}_i'^D + Y_i \mathbf{V}_i'^T).$$

donde $X_i = W/W_i Y_i$ es la fracción molar, $D_i' = D_i/D_{TA}$ es el coeficiente de difusión, y θ_i es la relación de termodifusión de la especie i en la mezcla. El flujo de calor \mathbf{q} es calculado utilizando la ley de Fourier generalizada (6), donde el efecto Dufour y el flujo de calor por radiación son despreciables en este problema.

- Los coeficientes dimensionales para μ , D_i , θ_i , D_T , h_i , y c_{pi} serán función de las propiedades termodinámicas locales de la mezcla (temperatura T y concentraciones Y_i de todas las especies). Sus valores han sido calculados usando las expresiones y parámetros desarrollados por [10] y la fórmulas de los polinomios NASA [14].
- Con respecto al modelo de cinética química diremos que una descripción detallada de este fenómeno implica docenas de especies químicas y centenares de reacciones elementales. Afortunadamente, muchos aspectos de la combustión pueden entenderse con modelos de química reducida. Para reproducir la extinción y reignición de llamas sería suficiente con usar el mecanismo de dos etapas propuesto por Mauss et al. en [13]



donde sería necesario trabajar solamente con $I = 5$ especies químicas: H_2 , O_2 , H , H_2O y la especie inerte N_2 . Este mecanismo cinético permite especificar los términos de reacción química \dot{m}_i como:

$$\begin{aligned} \dot{m}'_{H_2} &= W_{H_2}(-3w_I + w_{II})/(\rho_A A_{ext}) \\ \dot{m}'_{O_2} &= -W_{O_2}w_I/(\rho_A A_{ext}) \\ \dot{m}'_H &= W_H(2w_I - 2w_{II})/(\rho_A A_{ext}) \\ \dot{m}'_{H_2O} &= 2W_{H_2O}w_I/(\rho_A A_{ext}) \end{aligned}$$

donde las velocidades de reacción elemental w_I y w_{II} son calculadas como función de la temperatura y de las fracciones másicas siguiendo la indicaciones de [13] y los valores de las constantes de reacción tomadas del mecanismo de UC San Diego [18].

4.2.1. Simulaciones numéricas: interacción llama H_2 -aire/vortice

En esta sección, llevaremos a cabo varios experimentos numéricos para diferentes combinaciones de los parámetros adimensionales Pe_0 , \mathcal{R} and $\tilde{\Gamma}$ que son los que determinan la dinámica del problema. Se elegirán estos parámetros para poder comparar las simulaciones numéricas con resultados experimentales mostrados por Renard et al. en [16] para las condiciones dadas en su Tabla 1. La posición de la llama es medida experimentalmente detectando la concentración molar de OH , por lo tanto representaremos la posición de la llama de difusión dibujando isoclinas de C_{OH} que pueden ser calculadas utilizando la cinética química de Mauss et al [13], calculada a partir de las variables dependientes de nuestro problema.

Caso 1: Llamas débiles Consideraremos el caso de una llama muy débil, con una robustez $\mathcal{R} = 1.5$. La concentración másica de la corriente de combustible será $Y_{F0} = 0.015$, el número de Peclet $Pe_0 = 40$, y un vórtice de intensidad $\tilde{\Gamma} = 30$. La Figura 7 muestra distintos instantes de tiempo de los resultados numéricos obtenidos. La llama de difusión se extingue localmente y no logra la reignición, llegando a desaparecer.

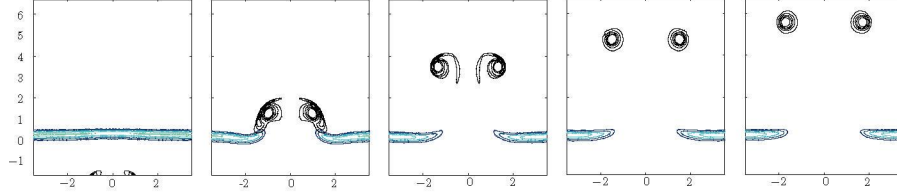


Figura 7: Interacción llama H_2 -aire/vórtice con $Pe_0 = 40$, $\tilde{\Gamma} = 30$ y $\mathcal{R} = 1.5$. Líneas claras de colores representan la concentración molar de OH , mientras que las líneas negras indican la posición del vórtice. Se han representado los instantes de tiempo $t = -0.075$, 0.075 , 0.125 , 0.575 y 0.825

Caso 2: Extinción axial seguida de reignición por frentes de llama activos Aquí se analiza el caso 1 del artículo de Renard et al. [16]. La concentración másica de combustible es $Y_{F0} = 0.015$ para este ejemplo, que con el resto de parámetros del experimento, define nuestro conjunto de parámetros adimensionales: $Pe_0 = 30$, $\tilde{\Gamma} = 33$ y $\mathcal{R} = 30$. En este caso, aunque la robustez de la llama es grande, el vórtice produce la extinción axial de la llama de difusión. Pero como los vórtices de llama están muy activos, consiguen la reignición de la llama como puede verse en la Figura 8.

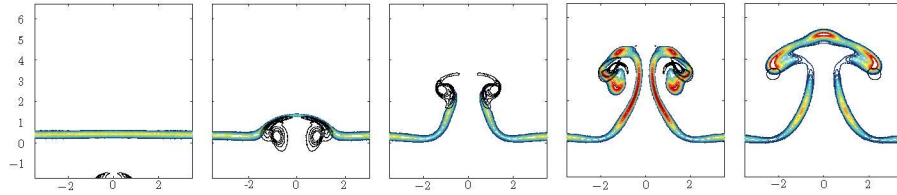


Figura 8: Interacción llama H_2 -aire/vórtice con $Pe_0 = 30$, $\tilde{\Gamma} = 33$ y $\mathcal{R} = 30$. Líneas claras de colores representan la concentración molar de OH , mientras que las líneas negras indican la posición del vórtice. Se han representado los instantes de tiempo $t = -0.175$, 0.000 , 0.175 , 0.350 y 0.550

Case 3: Llamas de robustez infinita El último caso que mostraremos se corresponde con el caso 3 del artículo de Renard et al. [16]. Se toma $Y_{F0} = 0.029$, que junto a $Pe_0 = 40$, $\tilde{\Gamma} = 40$ y $\mathcal{R} = 45$ definen el experimento. En la Figura 9 se muestran varios instantes de tiempo son mostrados. En este caso la llama es tan robusta que no se produce nunca la extinción local de la misma. Más aún, el vórtice al estar rodeado continuamente de alta temperatura se acaba difundiéndose.

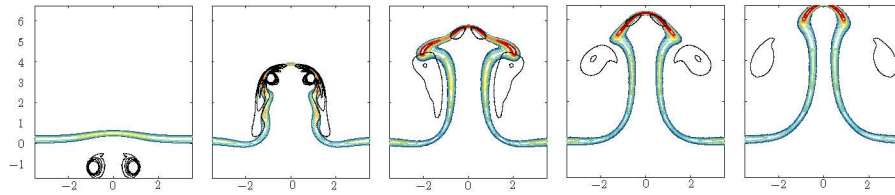


Figura 9: Interacción llama H_2 -aire/vórtice con $Pe_0 = 40$, $\tilde{\Gamma} = 40$ y $\mathcal{R} = 45$. Líneas claras de colores representan la concentración molar de OH , mientras que las líneas negras indican la posición del vórtice. Se han representado los instantes de tiempo $t = -0.075, 0.150, 0.375, 0.550$ y 0.775

Agradecimientos

Los autores quieren agradecer a los profesores Marcos Vera Coello (UC3M) y Miguel Hermanns Navarro (UPM) la ayuda prestada en la realización de este trabajo, en particular en todo lo relacionado con los procesos de combustión del Hidrógeno. Los autores también quieren agradecer la financiación económica del ‘Ministerio de Ciencia e Innovación’ a través del proyecto MTM2010-18079.

Referencias

- [1] M. Ainsworth, J.T. Oden. *A Posteriori Error Estimation in Finite Element Analysis*. Ed. Wiley (2000).
- [2] A. Allievi, R. Bermejo. *Finite element modified method of characteristics for Navier-Stokes equations*. Int. J. Numer. Meth. Fluids, 32 (2000) pp. 439-464.
- [3] I. Babuska, W.C. Rheinboldt. *Error estimates for adaptive finite element computations*. SIAM J. Numer. Anal., 15 (1978), pp. 736-754.
- [4] R. Bermejo, J. Carpio. *A semi-Lagrangian-Galerkin projection scheme for convection equations*. IMA Journal of Numerical Analysis, 30(3) (2010) pp. 799-831.
- [5] J. Carpio, J.L. Prieto, R. Bermejo. *Anisotropic ‘goal-oriented’ mesh adaptivity for elliptic problems*. SIAM J. Sci. Comput. 35(2) (2013) pp. A861-A865.
- [6] J. Carpio, J.L. Prieto. *An anisotropic, fully adaptive algorithm for the solution of convection dominated equations with semi-Lagrangian schemes*. En evaluación.
- [7] P.J. Frey, F. Alauzet. *Anisotropic mesh adaptation for CFD computations*. Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., 194 (2005), 5068-5082.
- [8] P.J. Frey. *Mmg3d: 3d Delaunay-based anisotropic mesh adaptation and mesh moving*. (2013). <http://www.math.u-bordeaux1.fr/~cdobrzyn/logiciels/download.php?file=mmg3d4.0.tgz>
- [9] F. Hecht. *Bamg: Bidimensional Anisotropic Mesh Generator*. (2006). <http://www.ann.jussieu.fr/~hecht/ftp/bamg/>
- [10] R.J. Kee, F.M. Rupley, J.A. Miller, M.E. Coltrin, J.F. Grcar, E. Meeks, H.K. Moffat, A.E. Lutz, G. Dixon-Lewis, M.D. Smooke, J. Warnatz, G.H. Evans, R.S. Larson, R.E. Mitchell, L.R. Petzold, W.C. Reynolds, M. Caracotsios, W.E. Stewart, and P. Glarborg, CHEMKIN Collection, Release 3.5, Reaction Design, Inc., San Diego, CA (1999).
- [11] M. Hermanns, M. Vera, A. Liñán. *On the dynamics of flame edges in diffusion-flame/vortex interaction*. Combustion and Flame, 149 (2007) pp. 32-48.

- [12] F.E. Marble, J.E. Broadwell, Project SQUID Technical Report TRW-9-PU, Project SQUID Headquarters, Chaffee Hall, Purdue University, (1977).
- [13] F. Mauss, N. Peters, B. Rogg, F.A. Williams. *Reduced kinetic mechanisms for premixed hydrogen flames*. N. Peters, B. Rogg (Eds.), Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems, Springer-Verlag (1993) pp. 29-43.
- [14] G.P. Smith, D.M. Golden, M. Frenklach, N.W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C.T. Bowman, R.K. Hanson, S. Song, W.C. Gardiner, V.V. Lissianski and Z. Quin. Gas Research Institute Mechanism. http://www.me.berkeley.edu/grid_mech/
- [15] B.P. Sommeijer, L.F. Shampine and J.G. Verwer. *RKC: An Explicit solver for Parabolic PDEs*. Modelling Analysis and Simulation (MAS) MAS-R9715 June 30, (1997).
- [16] P.H. Renard, J.C. Rolon, D. Thevenin, S. Candel. *Investigations of heat release, extinction, and time evolution of the flame surface for a non-premixed flame interacting with a vortex*. Combust. Flame 117 (1999) pp. 189-205.
- [17] P.H. Renard, D. Thevenin, J. C. Rolon, S. Candel. *Dynamics of flame/vortex interactions*. Prog. Energy Combust. Sci. 26 (2000) pp. 225-282.
- [18] P. Saxena, F.A. Williams. *Testing a small detailed chemical-kinetic mechanism for the combustion of hydrogen and carbon monoxide*. Combust. Flame, 145 (2006) pp. 316-323. También disponible en <http://maeweb.ucsd.edu/combustion/cermech/>